

BAB III

METODA PENELITIAN

Metoda yang digunakan dalam penyusunan tugas akhir ini adalah dengan penelusuran pustaka yang relevan dengan bidang yang dikaji. Penelusuran ini dimaksudkan agar diperoleh landasan teoretik yang dibutuhkan. Selanjutnya kajian-kajian pustaka ini disertai dengan pembahasan secara kualitatif.

Persamaan nilai f dari pers. (2-43) dapat diselesaikan apabila fungsi gelombang non relativistik Ψ untuk masing-masing aras transisi diketahui melalui metoda Hartree-Fock.

3.1. Metoda Hartree-Fock

Persamaan Schrödinger untuk sistem atomik berelektron banyak haruslah disederhanakan. Hal ini pertama kali diberikan oleh Hartree, yang menunjukkan bahwa persamaan untuk elektron tunggal dapat diterapkan pada atom berelaktron banyak. Potensial inti dan elektron-elektron digabungkan menghasilkan potensial pusat efektif, dengan asumsi masing-masing elektron bergerak relatif bebas seperti pada partikel bebas (Goswami, 1997).

Hartree mengasumsikan bahwa masing-masing elektron dalam sistem berelektron banyak digambarkan oleh fungsi gelombangnya sendiri. Anggapan yang dibuat oleh Hartree adalah fungsi energi potensial untuk

suatu elektron terhadap elektron kedua ditentukan dengan pendekatan fungsi gelombang untuk elektron kedua, yakni masing-masing elektron bergerak secara bebas dalam medan elektron-elektron yang lain. Potensial untuk elektron i diberikan oleh (Goswami, 1997):

$$V_i(r_i) = e^2 \sum_{j \neq i} \int \frac{|u_j(r_j)|^2}{r_{ij}} d\tau_j \quad (3-1).$$

Dengan indeks bawah j menunjukkan keadaan elektron ke- j . Asumsi tersebut berlaku terhadap seluruh elektron kecuali elektron ke- i , sehingga persamaan gelombang untuk masing-masing elektron u_i berupa:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} + e^2 \sum_{j \neq i} \int \frac{|u_j(r_j)|^2}{r_{ij}} d\tau_j \right) u_i(r_i) = \epsilon_i u_i(r_i) \quad (3-2).$$

Kekurangan mendasar dari metoda Hartree adalah fungsi gelombang pers. (2-28) tidak antisimetri dengan hasil pertukaran dengan dua set koordinat i dan j (Eisberg and Resnick, 1985). Persoalan ini diatasi oleh Fock dengan menggantikan hasil fungsi elektron tunggal dari pers. (2-28) dengan hasil yang terantisimetri (*antisymmetrized*), yang dapat ditulis sebagai suatu determinan (Hibbert, 1996).

Antisimetrisasi dari hasil N partikel $\Psi = \prod_i u_i(i)$ dapat dinyatakan dengan mengoperasikan operator antisimetri \hat{A} pada Ψ , dengan:

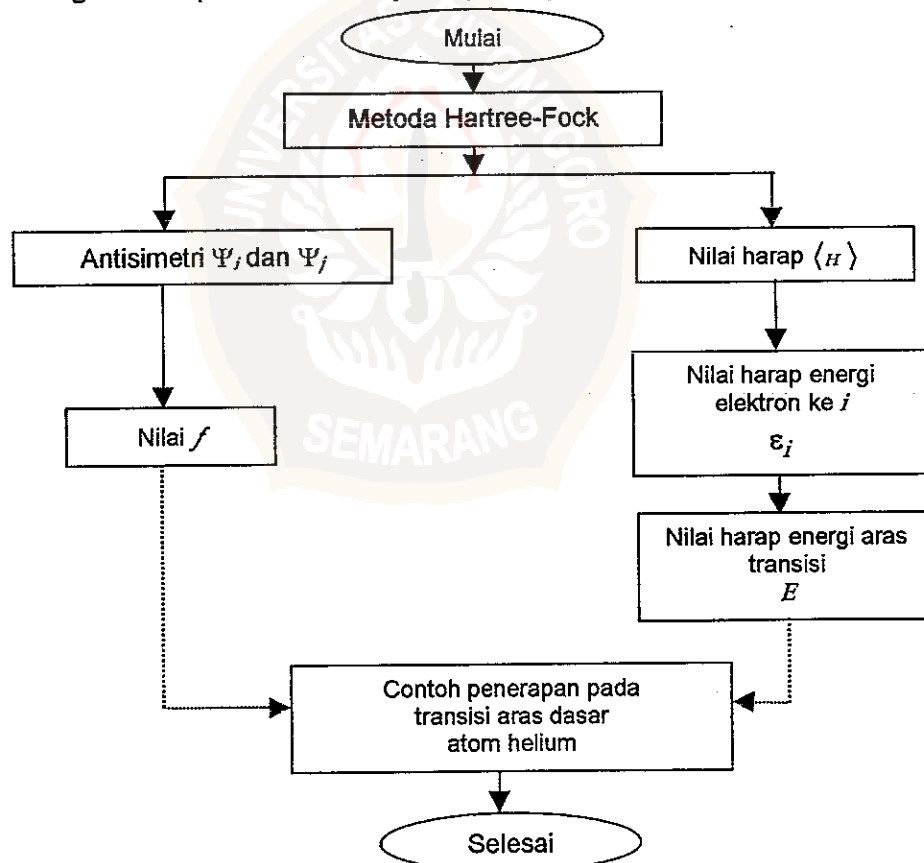
$$\hat{A} = (N!)^{1/2} \sum_i (-1)^P \hat{P}_i \quad (3-3).$$

\hat{P} adalah operator permutasi yang mengubah indeks partikel, indeks bawah i menunjukkan permutasi ke i , dan p adalah paritas permutasi (genap atau ganjil).

Proses antisimetri fungsi gelombang total Ψ sistem berelektron banyak ini dikenal sebagai metoda Hartree-Fock (Hibbert, 1996). Metoda ini merupakan perluasan teori gangguan (*perturbation theory expansion*) yang mampu memberikan pendekatan untuk menyederhanakan berbagai kerumitan dalam sistem berelektron banyak (Koltun and Eisenberg, 1988).

3.2. Diagram Alir Penelitian

Diagram alir penelitian disajikan pada gambar 3-1 berikut:



Gambar 3-1. Diagram alir penelitian